

Sujet de stage M2 (English on page 3)

Modélisation et simulation d'écoulements turbulents multicomposants supercritiques par modélisation des grandes échelles.

Lieu : Institut de Mécanique et d'Ingénierie Bordeaux (I2M), département TREFLE

Encadrement : Jérôme Jansen, Arnaud Erriguible

Contact : jerome.jansen@u-bordeaux.fr, aerriguible@bordeaux-inp.fr

Compétences recherchées : mécanique des fluides, turbulence, modélisation numérique, Fortran, Python, Linux

Durée / rémunération : 5 à 6 mois – Indemnité légale (~640€ / mois)

Le code open source **Notus** [1], développé au sein de l'I2M (équipe SiMFI), permet de simuler des écoulements incompressibles et compressibles par les approches *Direct Numerical Simulation* (DNS) et *Large Eddy Simulation* (LES) sur des architectures HPC. Un précédent stage a permis la validation et l'étude approfondi d'écoulement turbulent incompressible par approches DNS et LES sur des cas académiques (canal plan et tourbillons de Taylor-Green). La validation en écoulement subsonique compressible [2] d'une **corps pur** reste toutefois à entreprendre en LES. Cette étape est essentielle avant d'aborder des écoulements **multicomposants supercritiques**.

Le projet proposé vise dans un premier temps à valider la LES en considérant deux configurations académiques de référence en turbulence compressible subsonique : le jet et le canal plan (avec et/ou sans bi-périodicité). Les résultats seront comparés de manière rigoureuse aux données issues de DNS/LES de la littérature [3,4,5], tant pour les profils moyens que pour les statistiques turbulentes et les spectres d'énergie.

Dans un second temps, la méthodologie sera appliquée à la simulation en régime supercritique à haute pression d'un mélange binaire monophasique heptane/azote, ce choix permettant de disposer de données de référence [6,7]. Une adaptation de la méthode [2] aux écoulement multicomposants sera à étudier. Cette partie permettra d'explorer les effets spécifiques liés aux fortes variations des propriétés thermodynamiques et aux phénomènes de transferts (effet Soret et Dufour) dans un contexte de turbulence compressible supercritique.

En fonction de l'avancement du stage, une dernière configuration de type Rayleigh-Bénard pourra être adressée en présence d'un mélange de dioxyde de carbone et comparée avec des données très récente [8]. Cette dernière étape permettra également de comparer les modélisations proposées par les trois équipes (Bellan, Xiao, et SiMFI).

Pour toutes les simulations qui seront réalisées, un effort sera apporté sur l'imposition de conditions limites turbulentes réalistes d'entrée et de sortie [9,10] ainsi que sur la modélisation des propriétés physiques du mélange, tel que la viscosité, la conductivité thermique, les coefficients de diffusion massique et thermique [11]. Les simulations numériques seront réalisées sur le cluster MCIA de l'Université de Bordeaux, offrant une infrastructure de calcul haute performance (HPC).

Références :

[1] notus CFD, <https://notus-cfd.org/>

- [2] J. Jansen, S. Glockner, D. Sharma, A. Erriguible, Incremental pressure correction method for high-performance simulations of subsonic compressible flows *Computer Physics Communications*, 2025
- [3] F. Föll, S. Pandey, X. Chu, C.-D. Munz, E. Laurien & B. Weigand. High-Fidelity Direct Numerical Simulation of Supercritical Channel Flow Using Discontinuous Galerkin Spectral Element Method, *High Performance Computing in Science and Engineering ' 18*, Conference proceedings, 2019.
- [4] I.W. Kokkinakis, D. Drikakis, Implicit Large Eddy Simulation of weakly-compressible turbulent channel flow, *Comp. Meth. Appl. Mech. and Engineering*, 2015
- [5] N. Saran, J. Bellan, Investigation of high-pressure turbulent jets using direct numerical simulation, *J. Fluid Mech.*, 2021.
- [6] R.S. Miller, K.G. Harstad, J. Bellan, Direct numerical simulations of supercritical fluid mixing layers applied to heptane–nitrogen, *J. Fluid Mech.*, 2001.
- [7] N.A. Okong'o, J. Bellan, Direct numerical simulation of a transitional supercritical binary mixing layer: Heptane/Nitrogen, *J. Fluid Mech.*, 2002.
- [8] M. Xiao, Y. Ren, J. Yang, Z.-C. Hu, Turbulent Rayleigh–Bénard convection in a supercritical CO₂-based binary mixture with cross-diffusion effects, *IJHMT*, 2024.
- [9] R. Poletto, T. Craft, and A. Revell. A New Divergence Free Synthetic Eddy Method for the Reproduction of Inlet Flow Conditions for LES. *Flow, Turbulence and Combustion*, 2013
- [10] N.A. Okong'o , J. Bellan, Consistent boundary conditions for multicomponent real gas mixtures based on characteristic waves, *J. Comput. Phys.*, 2002.
- [11] J. Bellan, *Future Challenges in the Modelling and Simulations of High-pressure Flows*, *Combustion Science and Technology*, 2020.

Master's Thesis Internship

Modeling and simulation of supercritical multi-component turbulent flows by large eddy modeling.

Location: Institut de Mécanique et d'Ingénierie Bordeaux (I2M), TREFLE department

Supervision: Jérôme Jansen, Arnaud Erriguible

Contact: jerome.jansen@u-bordeaux.fr, aerriguible@bordeaux-inp.fr

Skills: fluid mechanics, turbulence, compressible flow, numerical modeling, Fortran, Python, Linux

Duration / Remunération : 5 to 6 months – Legal compensation (~640€/month)

The open source **Notus** code [1], developed within I2M (SiMFI team), allows the simulation of incompressible and compressible flows using Direct Numerical Simulation (DNS) and Large Eddy Simulation (LES) approaches on HPC architectures. A previous internship enabled the validation and in-depth study of incompressible turbulent flow using DNS and LES approaches on academic cases (plane channel and Taylor-Green vortices). However, validation in compressible subsonic flow [2] of a *pure fluid* remains to be undertaken in LES. This step is essential before addressing **supercritical multi-component** flows.

The proposed project initially aims to validate LES by considering two academic reference configurations in subsonic compressible turbulence: the jet and the plane channel (with and/or without bi-periodicity). The results will be rigorously compared with DNS/LES data from the literature [3,4,5], both for mean profiles and for turbulent statistics and energy spectra.

Secondly, the methodology will be applied to the high-pressure supercritical simulation of a single-phase heptane/nitrogen binary mixture, this choice providing reference data [6,7]. An adaptation of the method [2] to multi-component flows will be studied. This section will explore the specific effects related to strong variations in thermodynamic properties and transfer phenomena (Soret and Dufour effects) in a context of supercritical compressible turbulence.

Depending on the progress of the internship, a final Rayleigh-Bénard configuration may be addressed in the presence of a carbon dioxide mixture and compared with very recent data [8]. This final step will also allow for a comparison of the models proposed by the three teams (Bellan, Xiao, and SiMFI).

For all simulations that will be carried out, an effort will be made to impose realistic turbulent inlet and outlet boundary conditions [9,10] as well as to model the physical properties of the mixture, such as viscosity, thermal conductivity, mass and thermal diffusion coefficients [11]. The numerical simulations will be carried out on the MCIA cluster of the University of Bordeaux, offering a (HPC) infrastructure.